

Technische Universität Ilmenau
Fakultät für Mathematik
und Naturwissenschaften
Institut für Mathematik

Postfach 100565
98684 Ilmenau
Germany
Tel.: 03677/693267
Fax: 03677/693270
Telex: 33 84 23 tuil d.

Preprint No. M 5/95

Die Integro- Interpolationsmethode für Zweipunktrandwertaufgaben

Werner Neundorf

March 1995

[‡]MSC (1991): 65L10, 65L12, 76R99

Die Integro-Interpolationsmethode oder Boxmethode hat sich als weit verbreitetes Verfahren zur Lösung von Randwertaufgaben (RWA) bewiesen und ist intensiv auf ihre Eigenschaften untersucht worden. Interessante Aspekte ergeben sich jedoch auch, wenn man mit Verfahren arbeitet, die in der Nachbarschaft der Boxmethode liegen, und damit nicht mehr ihre klassischen Eigenschaften besitzen. Diese Modifikationen werden hier diskutiert. Es wird gezeigt, unter welchen Voraussetzungen an die RWA und/oder Verfahrensparameter akzeptable Ergebnisse zu erwarten sind.

The integro-interpolation method or the box method has been developed and widely used to solve boundary value problems (BVP). Its features are investigated largely. However, we obtain interesting aspects if the schemes lie near the box method and don't possess its classical attributes. In our effort to explain such modifications we show the conditions with respect to BVP and/or discretization parameters in order to get acceptable results.

1 Einleitung

Die Diskretisierungsverfahren für Zweipunktrandwertaufgaben (RWA) reichen von den klassischen Ansätzen als Differenzenverfahren über Schießverfahren, Upwindverfahren, FEM-Ansätze, Boxmethode hin bis zu speziellen Verfahren für singulär gestörte Aufgaben.

Unter Berücksichtigung der Erhaltungssätze der Physik erfolgt die Konstruktion von homogenen und konservativen Diskretisierungsverfahren.

Die Integro-Interpolationstechnik oder auch Boxmethode genannt (engl. cell-vertex method, finite volume scheme) gehört zu der Klasse von Schemata, wo für Elementarvolumina (Boxen, Zellen) die physikalischen Erhaltungsgleichungen angesetzt werden.

In MACKENZIE und MORTON [1] wird ein breites Spektrum von Boxformulierungen für Konvektions-Diffusions-Probleme behandelt und auf interessante Eigenschaften verwiesen. Auf weitere Aspekte wird in diesem Artikel hingewiesen, wenn Modifikationen in den Ansätzen der Boxmethode für ausgewählte RWA vorgenommen werden.

Als RWA werden betrachtet

$$Ly(x) \equiv -(ky')' + qy = f, \quad x \in \Omega = (0, 1), \quad (1.1)$$

$$y(0) = 0, \quad y(1) = 1,$$

mit den Koeffizientenfunktionen $k > 0$, $q \geq 0$, sowie das einfache singulär gestörte Problem

$$Ly(x) \equiv -(\varepsilon y' - ry)' = f, \quad x \in \Omega = (0, 1), \quad (1.2)$$

$$y(0) = 0, \quad y(1) = 1,$$

mit den Konstanten $0 < \varepsilon \ll 1$, $r \geq 0$ bzw. auch $r = r(x) \geq 0$.

2 Die Boxmethode

Zunächst betrachten wir das Problem (1.1). Man definiert auf $\overline{\Omega} = [0,1]$ das Gitter

$$\omega_h = \{0 = x_0 < x_1 \dots < x_{N-1} < x_N = 1\}, \quad (2.1)$$

$$\begin{aligned} h_j &= x_j - x_{j-1}, \\ h_j &= \frac{1}{2}(h_j + h_{j+1}) = \frac{1}{2}(x_{j+1} - x_{j-1}), \\ x_{j+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{2}(x_j + x_{j+1}). \end{aligned}$$

Die Konstruktion der Boxmethode auf äquidistantem Gitter ($h_j = h$) erfolgt gemäß SAMARSKIJ [2] unter Einführung des Flusses $W = -ky'$ auf der Elementarzelle $[x_{j-\frac{1}{2}}, x_{j+\frac{1}{2}}]$. Mit

$$-W' + f = qy \quad (2.2)$$

erhält man die Energiebilanz

$$W_{j-\frac{1}{2}} - W_{j+\frac{1}{2}} + \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} f \, dx = \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} q \, y \, dx. \quad (2.3)$$

Unter der Annahme, daß y intervallweise konstant ist, ergibt sich die Boxmethode

$$\begin{aligned} -\frac{1}{h} \left(a_{j+1} \frac{Y_{j+1} - Y_j}{h} - a_j \frac{Y_j - Y_{j-1}}{h} \right) + d_j Y_j &= \varphi_j, \\ -(aY_{\overline{x}})_x + dY &= \varphi, \end{aligned} \quad (2.4)$$

wobei die Gitterfunktionale

$$a_j = \left[\frac{1}{h} \int_{x_{j-1}}^{x_j} \frac{dx}{k} \right]^{-1}, \quad d_j = \frac{1}{h} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} q \, dx, \quad \varphi_j = \frac{1}{h} \int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} f \, dx \quad (2.5)$$

die Homogenität des Verfahrens garantieren. Bei geeigneter einfacher Approximation der Funktionale (2.5) erkennt man in der Boxmethode das zentrale Dreipunktdifferenzschema wieder. Die Forderung der Erhaltung der Konservativität für (1.1) liefert also ein symmetrisches Schema und erlaubt die Anwendung des diskreten Maximumsprinzips auf dieses.

2.1 Verschiebung der Elementarzelle

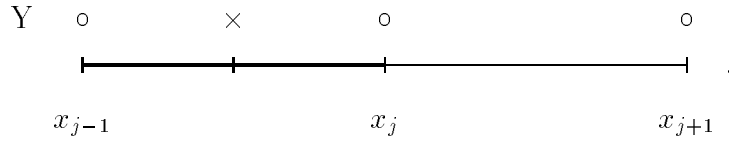
Es liegt durchaus nahe, das Intervall $[x_{j-1}, x_j]$ als Elementarzelle für die Energiebilanz heranzuziehen. Die Folge der Integration von (1.1) auf dieser Zelle ist

$$-(ky'_j - ky'_{j-1}) + \int_{x_{j-1}}^{x_j} qy dx = \int_{x_{j-1}}^{x_j} f dx \quad (2.6)$$

und mit bergang zur Approximation der Form

$$-\frac{1}{h} \left(\underbrace{k_{j+\frac{1}{2}}}_{a_{j+1}} \frac{Y_{j+1} - Y_j}{h} - \underbrace{k_{j-\frac{1}{2}}}_{a_j} \frac{Y_j - Y_{j-1}}{h} \right) + Y_{j-\frac{1}{2}} \underbrace{\frac{1}{h} \int_{x_{j-1}}^{x_j} q dx}_{d_j} = \underbrace{\frac{1}{h} \int_{x_{j-1}}^{x_j} f dx}_{\varphi_j} \quad (2.7)$$

entsteht ein Schema mit folgender Funktionswertverteilung Y

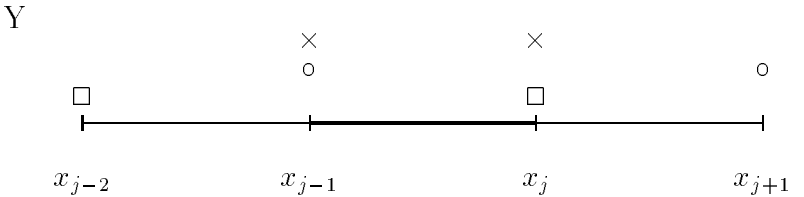


Die Differenzenapproximation ist somit verschoben und die Konservativität wird verletzt (naive Diskretisation).

Geschickter ist eine Approximation von (2.6), die die Symmetrie erhält. Sie lautet

$$-\frac{1}{h} \left(k_j \frac{Y_{j+1} - Y_{j-1}}{2h} - k_{j-1} \frac{Y_j - Y_{j-2}}{2h} \right) + \frac{Y_j + Y_{j-1}}{2} \frac{1}{h} \int_{x_{j-1}}^{x_j} q dx = \frac{1}{h} \int_{x_{j-1}}^{x_j} f dx \quad (2.8)$$

mit der Verteilung Y



wobei jedoch im Vergleich zu (2.7) ein weiterer Funktionswert Y_{j-2} außerhalb der Zelle liegt.

Die Konservativität ist erfüllt, denn aus dem Fluß $W = -ky'$ folgt

$$-\int_{x_{j-1}}^{x_{j+1}} y' dx = -(y_{j+1} - y_{j-1}) = \int_{x_{j-1}}^{x_{j+1}} \frac{W}{k} dx \approx W_j \int_{x_{j-1}}^{x_{j+1}} \frac{dx}{k},$$

$$W_j = - \left[\frac{1}{2h} \int_{x_{j-1}}^{x_{j+1}} \frac{dx}{k} \right]^{-1} \frac{Y_{j+1} - Y_{j-1}}{2h},$$

$$a_{j+1} = \left[\frac{1}{2h} \int_{x_{j-1}}^{x_{j+1}} \frac{dx}{k} \right]^{-1} \approx k_j.$$

Die Erhaltung der Symmetrie im Schema (2.8) mittels seiner Konservativität heißt jedoch nicht, daß das dabei entstehende Gleichungssystem alle Vorzüge der klassischen Boxmethode bewahrt. Stellen wir dieses System $A_h Y = F_h$ im Falle $f = 0$, $q = 0$, $k = \text{const}$ auf, so heißen die einzelnen Gleichungen

$$-Y_{j-2} + Y_{j-1} + Y_j - Y_{j+1} = 0, \quad j = 2, 3, \dots, N-1, \quad (2.9)$$

und für $j = 1$, da Y_{-1} nicht auftritt, wahlweise mit zwei unterschiedlichen Differenzenquotienten

$$-\frac{1}{h} \left(k \frac{Y_{j+1} - Y_{j-1}}{2h} - k \frac{Y_j - Y_{j-1}}{h} \right) = 0, \quad (2.10)$$

oder bei einheitlicher Anwendung des Vorwärtsdifferenzenquotienten 1.Ordnung

$$-\frac{1}{h} \left(k \frac{Y_{j+1} - Y_j}{h} - k \frac{Y_j - Y_{j-1}}{h} \right) = 0. \quad (2.11)$$

Somit ist die Gleichung am linken Rand

$$2Y_1 - Y_2 = \begin{cases} \frac{1}{2}Y_O & , \quad \text{falls (2.10)} \\ Y_O & , \quad \text{falls (2.11)} \end{cases}.$$

Die Koeffizientenmatrix des Systems hat die Bandgestalt

$$A_h = \begin{bmatrix} 2 & -1 & & & 0 \\ 1 & 1 & -1 & & \\ -1 & 1 & 1 & -1 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 0 & & & -1 & 1 & 1 \end{bmatrix}_{(N-1) \times (N-1)}. \quad (2.12)$$

Sie ist regulär, aber von all den anderen günstigen Eigenschaften wie Diagonaldominanz, L-Matrix, M-Matrix, Monotonie ist keine erfüllt. Damit ist auch das diskrete Maximumprinzip nicht anwendbar. Es gilt jedoch für die inverse Matrix

$$A_h^{-1} = \frac{1}{N} \begin{bmatrix} & 1 \\ & 2 \\ \cdots & 3 \\ & \vdots \\ & N-1 \end{bmatrix}, \quad (2.13)$$

z.B. bei $N = 6$ erhält man

$$A_h^{-1} = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} 3 & 2 & 2 & 1 & 1 \\ 0 & 4 & 4 & 2 & 2 \\ 3 & 0 & 6 & 3 & 3 \\ 0 & 2 & 2 & 4 & 4 \\ 3 & -2 & 4 & -1 & 5 \end{bmatrix} = (\alpha_{ij}), \quad \alpha_{ij} \not\geq 0,$$

$A_h x \geq 0 \not\Rightarrow x \geq 0$ (Gegenbeispiel $x = (1, -1, 1, -1, 1)^T$).

Was ist nun der Vorzug an der Matrix A_h ?

Gemäß der Randbedingung (RB) $Y_0 = 0, Y_N = 1$ erhalten wir

$$\begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Y_3 \\ \vdots \\ Y_{N-2} \\ Y_{N-1} \end{bmatrix} = A_h^{-1} \begin{bmatrix} \frac{1}{2}Y_0 & | & Y_0 \\ Y_0 & \\ 0 & \\ \vdots & \\ 0 & \\ Y_N \end{bmatrix} = A_h^{-1} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{N} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ \vdots \\ N-2 \\ N-1 \end{bmatrix},$$

$$0 = Y_0 < Y_1 = \frac{1}{N} < Y_2 = \frac{2}{N} < \dots < Y_{N-1} = \frac{N-1}{N} < Y_N = 1,$$

und somit die Monotonie der Lösung Y .

Trotzdem ist die RB (2.11) gegenüber (2.10) vorzuziehen, da letztere nichtsymmetrische Terme enthält. Die Auswirkung würde sofort erkennbar sein, wenn $Y_0 \neq 0$ ist. Während im Fall (2.11) keine Störungen des monotonen Verhaltens der Näherungslösung auftreten, liefert die Formel (2.10) im Falle $N = 6$ mit (beispielhaft)

$$\begin{array}{rcl} Y_0 & = & 1 \\ -y'' & = & 0 \\ y(x) & = & 1 \end{array} \quad A_h^{-1} \begin{bmatrix} 0,5 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} 4,5 \\ 6 \\ 4,5 \\ 6 \\ 4,5 \end{bmatrix},$$

$$\begin{array}{rcl} Y_0 & = & 0,5 \\ -y'' & = & 0 \\ y(x) & = & \frac{x+1}{2} \end{array} \quad A_h^{-1} \begin{bmatrix} 0,25 \\ 0,5 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} 2,75 \\ 4 \\ 3,75 \\ 5 \\ 4,75 \end{bmatrix},$$

$$\begin{array}{rcl} Y_0 & = & 1 \\ -y'' & = & -18 \\ y(x) & = & 9x(x-1) + 1 \end{array} \quad A_h^{-1} \begin{bmatrix} 0,5 \\ 0 \\ -1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} -4,5 \\ -6 \\ -10,5 \\ -6 \\ -4,5 \end{bmatrix}, \quad Y_2'' < 0,$$

wegen Verletzung der Monotonie oder Konvexität unbefriedigende Ergebnisse.

3 Die Boxmethode für die RWA (1.2)

Wir bemerken zunächst, daß für die RWA (1.2) mit konstanten Koeffizienten ε , r die Boxmethode auf $[x_{j-\frac{1}{2}}, x_{j+\frac{1}{2}}]$ mit dem zentralen Dreipunkt-Differenzenschema 2. Ordnung

$$(LY)_j \equiv \varepsilon \frac{1}{h^2} (-Y_{j+1} + 2Y_j - Y_{j-1}) + r \frac{1}{2h} (Y_{j+1} - Y_{j-1}) = f_j \quad (3.1)$$

vergleichbar ist. Wenn für die Maschenweite h die Ungleichung

$$\beta = \frac{rh}{\varepsilon} \leq 2, \quad h \leq \frac{2\varepsilon}{r} \quad (3.2)$$

erfüllt ist, sind die Bedingungen für die Anwendung des diskreten Maximumprinzips gegeben. Für den Fall einer Koeffizientenfunktion $r = r(x) \leq r_{max}$ folgt die Beschränkung der Maschenweite gemäß $h \leq \frac{2\varepsilon}{r_{max}}$.

Der Idee aus Punkt 2.1 (2.8) folgend haben MACKENZIE und MORTON [1] auf der Box $[x_{j-1}, x_j]$ das Schema

$$(LY)_j \equiv \frac{1}{h_j} [\varepsilon(Y'_j - Y'_{j-1}) - r(Y_j - Y_{j-1})] = -\frac{1}{h_j} \int_{x_{j-1}}^{x_j} f dx \equiv -f_j \quad (3.3)$$

mit zwei Varianten der Approximation der Ableitung

$$Y'_j = \alpha_j \frac{Y_{j+1} - Y_j}{h_{j+1}} + (1 - \alpha_j) \frac{Y_j - Y_{j-1}}{h_j},$$

$$\alpha_j = \frac{h_{j+1}}{h_j + h_{j+1}} \in (0, 1) \quad \text{Methode A von MACKENZIE [3],}$$

$$\alpha_j = \frac{h_j}{h_j + h_{j+1}} \quad \text{Methode B,}$$

untersucht und positive Ergebnisse bzgl. Genauigkeit und Monotonie der Lösung erhalten.

Trotz Symmetrie des Schemas führt die Wahl von zwei Punkten Y_{j-2}, Y_{j+1} außerhalb der Box zu Problemen. Dies wird deutlich bei der Betrachtung der Stabilität der Boxmethode.

Dazu notieren wir die ausschlaggebenden Gleichungen des homogenen Systems. Die RB bei $x = 0$ mit der Extrapolation $Y'_0 = 2 \frac{Y_1 - Y_2}{h_1} - 1 \cdot Y'_1$ liefert

$$\left(\frac{rh_1 + 2\varepsilon\alpha_1}{h_1} + \frac{2\varepsilon\alpha_1}{h_2} \right) Y_1 - \frac{2\varepsilon\alpha_1}{h_2} Y_2 = \frac{rh_1 + 2\varepsilon\alpha_1}{h_1} Y_0 \quad (3.4)$$

und sonst gilt die Beziehung

$$\begin{aligned} -\frac{\varepsilon(1 - \alpha_{j-1})}{h_{j-1}} Y_{j-2} &- \left[\frac{rh_j - \varepsilon(1 - \alpha_j - \alpha_{j-1})}{h_j} - \frac{\varepsilon(1 - \alpha_{j-1})}{h_{j-1}} \right] Y_{j-1} \\ &+ \left[\frac{rh_j - \varepsilon(1 - \alpha_j - \alpha_{j-1})}{h_j} + \frac{\varepsilon\alpha_j}{h_{j+1}} \right] Y_j - \frac{\varepsilon\alpha_j}{h_{j+1}} Y_{j+1} = 0, \\ &j = 2, 3, \dots, N-1. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Wenn $r = 0$ ist sind die Elemente der Hauptdiagonalen und der Subdiagonalen der Koeffizientenmatrix positiv (siehe (2.12)), die Anwendung des Maximumprinzips versagt und man muß auf Monotonieeigenschaften der Lösung ausweichen.

Nur für $r > 0$ können negative Werte auf den drei Nebendiagonalen entstehen, die dann zu Stabilitätsaussagen und Beschränktheitsbedingungen an die Maschenweite führen.

In MACKENZIE und MORTON [1] sind diese Bedingungen für den Fall $r = r(x)$ hergeleitet (damit $r = r_1$ in (3.4), $r = r_j$ in (3.5)) und lauten zusammengefaßt:

Methode A

$$r_j(h_{j+1} + h_j) \geq \varepsilon, \quad j = 2, 3, \dots, N - 1. \quad (3.6)$$

Methode B

$$\begin{aligned} r_j(h_{j+1} + h_j)h_{j-1} &\geq \varepsilon(h_{j+1} + h_j - h_{j-1}), \\ \varepsilon(h_{j+1}h_{j-1} + h_j^2 + h_jh_{j-1}) + r_jh_{j+1}(h_{j+1} + h_j)(h_j + h_{j-1}) &\geq \varepsilon h_{j+1}^2. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Beide Methoden bei $h = h_j$

$$2r_jh \geq \varepsilon, \quad h \geq \frac{\varepsilon}{2r_j}. \quad (3.8)$$

Die Maschenweite darf also auch nicht zu klein werden. Wenn $r \geq r_{min} > 0$ ist, erhält man als untere Schranke den Wert $\frac{2\varepsilon}{r_{min}}$.

Somit kann im Fall $r = const > 0$ die Maschenweite h aus dem Intervall $[\frac{\varepsilon}{2r}, \frac{2\varepsilon}{r}]$ gewählt werden, so daß ein bergang vom Algorithmus der Boxmethode zu dem des zentralen Dreipunkt-Differenzenschemas möglich ist. Bei $r = r(x)$ ist das Intervall der zulässigen gemeinsamen Maschenweite $[\frac{\varepsilon}{2r_{min}}, \frac{2\varepsilon}{r_{max}}]$, daß jedoch für $r_{max} > 4r_{min}$ verschwindet.

Die Stabilität von (3.4), (3.5) folgt aus dem Vergleichskriterium und mit der Maximumnorm und dem lokalen Diskretisierungsfehler $\tau = L_h(y)_h - f_h$ erhält man die Fehlerschätzung

$$\|(y)_h - Y\|_\infty \leq \frac{1}{r_{min}} \|\tau\|_\infty, \quad r \geq r_{min} > 0. \quad (3.9)$$

3.1 Eigenschaften der Systemmatrix

Es ist durchaus wichtig, hier auf einige Eigenschaften des Systems $A_h Y = F_h$ gemäß (3.4), (3.5) mit den RB $Y_0 = 0, Y_N = 1$ hinzuweisen. Mit der Bezeichnung $\beta = \frac{rh}{\varepsilon} \geq 0, r = r_j, h = h_j$, notieren wir dieses in der Form

Y_0

$$\begin{aligned}
& -1-\beta \begin{bmatrix} 2+\beta & -1 & & & \\ -(2\beta-1) & 1+2\beta & -1 & & \\ & -1 & -(2\beta-1) & 1+2\beta & -1 \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & -1 & -(2\beta-1) & 1+2\beta & -1 \\ & & & & -1 & -(2\beta-1) & 1+2\beta \end{bmatrix} -1 \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Y_3 \\ \vdots \\ Y_{N-2} \\ Y_{N-1} \end{bmatrix} = F_h. \quad (3.10)
\end{aligned}$$

 Y_N

A_h ist eine reguläre Matrix. Für $\beta = 0$ hat sie die Gestalt (2.12).

Für unterschiedliche Parameterbereiche β gilt folgendes:

- $\beta \geq \frac{1}{2}$: A_h ist eine M-Matrix,
damit liegt eine monotone Lösung vor.
 $Y_{j+1} = (1+2\beta)Y_j + (1-2\beta)Y_{j-1} - Y_{j-2},$
 $Y_{j+1} - Y_j = 2\beta(Y_j - Y_{j-1}) + (Y_{j-1} - Y_{j-2}),$
wegen $Y_0 = 0, Y_1 \geq Y_0, Y_2 \geq Y_1$ gilt $Y_{j+1} \geq Y_j$.
- $0 \leq \beta < \frac{1}{2}$: A_h ist keine M-Matrix.
Die Lösung ist jedoch wie im vorhergehenden Fall monoton.
- $0 < \beta_1 \leq \beta < \frac{1}{2}$: A_h ist monoton.
- $0 \leq \beta \leq \beta_1$: A_h ist nicht monoton.
Der Wert β_1 hängt von N ab.
Für $N = 11$ gilt $\beta_1 \approx 0.22$.
- $\beta = 0$: Die Eigenwerte der Matrix A_h erfüllen die Bedingungen
 - (1) $\operatorname{Re} \lambda(A_h) > 0$.
 - (2) $\lim_{N \rightarrow \infty} \min |\lambda(A_h)| = 0$.
 - (3) Die reellen Eigenwerte sind unter allen die betragskleinsten.

Damit kann im Fall $\beta = 0$ für eine beliebige feine Diskretisierung ($h \rightarrow 0$) keine obere Schranke für die Norm der inversen Matrix A_h^{-1} angegeben werden.

Bei einer unteren Schranke von h gemäß $\varepsilon/(2r_{\min})$ (3.8) gilt jedoch $\|A_h^{-1}\| \leq M$ und damit die Stabilität der Boxmethode.

Literatur

- [1] MACKENZIE, J.A.; MORTON, K.W.: *Finite volume solution of convection-diffusion test problems*. Math. Comp. 60 (1993), 189-220.
- [2] SAMARSKIJ, A.A.: *Theorie der Differenzenverfahren*. Akademische Verlagsgesellschaft Geest & Portig K.-G., Leipzig 1984.
- [3] MACKENZIE, J.A.: *The cell vertex method for viscous transport problems*. Technical Report NA 89/4 Oxford University Computing Laboratory, 11 Keble Road, Oxford OXI 3QD 1989.

Anschrift:

Dr. Werner Neundorf
Institut für Mathematik
Technische Universität Ilmenau
PSF 100565
D - 98684 Ilmenau
e-mail : neundorf@mathematik.tu-ilmenau.de